

**EUR 4083 f**

**COMMUNAUTE EUROPEENNE DE L'ENERGIE ATOMIQUE - EURATOM**

**LIBRARY**

**LES PROPRIETES NUMERIQUES DE L'ALGORITHME  
QUOTIENT-DIFFERENCE**

**Conférences données par le Prof. H. RUTISHAUSER**

**Rapporteur : R.-F. GLODEN**

**1968**



**Centre Commun de Recherche Nucléaire  
Etablissement d'Ispira - Italie**

**Centre de Traitement de l'Information Scientifique - CETIS**

## AVERTISSEMENT

Le présent document a été élaboré sous les auspices de la Commission des Communautés Européennes.

Il est précisé que la Commission des Communautés Européennes, ses contractants, ou toute personne agissant en leur nom :

ne garantissent pas l'exactitude ou le caractère complet des informations contenues dans ce document, ni que l'utilisation d'une information, d'un équipement, d'une méthode ou d'un procédé quelconque décrits dans le présent document ne porte pas atteinte à des droits privés;

n'assument aucune responsabilité pour les dommages qui pourraient résulter de l'utilisation d'informations, d'équipements, de méthodes ou procédés décrits dans le présent document.

Ce rapport est vendu dans les bureaux de vente indiqués en 4<sup>e</sup> page de couverture

au prix de FF 6,—

FB 60,—

DM 4,80

Lit. 750

4,30

**Prière de mentionner, lors de toute commande, le numéro EUR et le titre qui figurent sur la couverture de chaque rapport.**

Imprimé par SMEETS  
Bruxelles, novembre 1968

Le présent document a été reproduit à partir de la meilleure copie disponible.

**EUR 4083 f**

**COMMUNAUTE EUROPEENNE DE L'ENERGIE ATOMIQUE - EURATOM**

## **LES PROPRIETES NUMERIQUES DE L'ALGORITHME QUOTIENT-DIFFERENCE**

**Conférences données par le  
Prof. H. RUTISHAUSER**

**à Ispra durant la période du 22 au 26 avril 1968**

**Rapporteur : R.-F. GLODEN**

**EUR 4083 f**

THE NUMERICAL PROPERTIES OF THE QUOTIENT-DIFFERENCE ALGORITHM - Lectures given by Prof. H. RUTISHAUSER at Ispra during the period from April 22 - 26, 1968  
Editor : R.-F. GLODEN

European Atomic Energy Community - EURATOM  
Joint Nuclear Research Center - Ispra Establishment (Italy)  
Scientific Information Processing Center - CETIS  
Luxembourg, November 1968 - 42 Pages - FB 60

The present lectures are devoted to the numerical properties of the qd-algorithm and contain new developments.

The lecturer considers different variants of this algorithm : progressive form with or without shifts, stationary form, and examines the influence of round-off errors.

**EUR 4083 f**

THE NUMERICAL PROPERTIES OF THE QUOTIENT-DIFFERENCE ALGORITHM - Lectures given by Prof. H. RUTISHAUSER at Ispra during the period from April 22 - 26, 1968  
Editor : R.-F. GLODEN

European Atomic Energy Community - EURATOM  
Joint Nuclear Research Center - Ispra Establishment (Italy)  
Scientific Information Processing Center - CETIS  
Luxembourg, November 1968 - 42 Pages - FB 60

The present lectures are devoted to the numerical properties of the qd-algorithm and contain new developments.

The lecturer considers different variants of this algorithm : progressive form with or without shifts, stationary form, and examines the influence of round-off errors.

LIBRARY

éaire

ifique - CETIS

## **RESUME**

Les présentes conférences sont consacrées aux propriétés numériques de l'algorithme  $qd$  et contiennent de nouveaux développements.

Le conférencier considère diverses variantes de cet algorithme : forme progressive avec ou sans translations, forme stationnaire, et examine l'influence des erreurs d'arrondissement.

## **MOTS-CLES**

MATHEMATICS  
CALCULATIONS  
LECTURES

## TABLE DES MATIERES

---

	<u>Pages</u>
1. Introduction	1
2. Lignes qd positives	4
3. Choix des translations	12
4. Influence de l'arithmétique	17
5. Propriétés persistantes de l'algorithme qd	21
6. Influence des erreurs d'arrondissement	27
7. Forme stationnaire de l'algorithme qd	31



# LES PROPRIETES NUMERIQUES DE L'ALGORITHME QUOTIENT-DIFFERENCE \*)

## 1. Introduction

Un important domaine d'application de l'algorithme qd est constitué par le calcul des valeurs propres de matrices tri-diagonales. Une telle matrice peut se ramener en général moyennant une transformation de similitude triviale à la forme

$$(1) \quad A = \begin{pmatrix} q_1 & -q_1 & & & 0 \\ -e_1 & q_2+e_1 & -q_2 & & \\ & -e_2 & q_3+e_2 & -q_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & -e_{n-1} & q_n+e_{n-1} \end{pmatrix}$$

Les  $2n-1$  paramètres indépendants contenus dans  $A$  sont groupés dans une ligne appelée qd

$$(2) \quad Z = \{ q_1, e_1, q_2, \dots, e_{n-1}, q_n \}$$

Nous désignons par valeurs propres de  $Z$  les valeurs propres de la matrice correspondante  $A$ .

Nous passons moyennant l'algorithme qd avec la translation  $v$  de  $Z$  à une nouvelle ligne  $Z' = \{ q'_1, e'_1, \dots, q'_n \}$  suivant la loi

$$(3) \quad \begin{aligned} q'_1 &= (q_1 - v) + e_1 ; e_n := 0 ; \\ \text{for } k &:= 2 \text{ step } 1 \text{ until } n \text{ do} \\ \quad \text{begin} \\ \quad \quad e'_{k-1} &:= q_k * (e_{k-1} / q'_{k-1}) \\ \quad \quad q'_k &:= ((q_k - e'_{k-1}) - v) + e_k ; \\ \quad \text{end} ; \end{aligned}$$

\*) Manuscrit reçu le 14 août 1968.

Il est évident que ces opérations ne peuvent être effectuées qu'à la condition qu'aucun des nombres  $q'_1, q'_2, \dots, q'_{n-1}$  apparaissant comme dénominateurs dans (3) ne s'annule.

Moyennant (3) nous obtenons une nouvelle ligne qd  $z' = \{q'_1, e'_1, \dots, q'_n\}$ , pour laquelle la matrice correspondante  $A'$  s'écrit :

$$(4) \quad A' = \begin{pmatrix} q_1 + e_1 - v & -q'_1 & & 0 \\ -\frac{e_1 q_2}{q'_1} & q_2 + e_2 - v & -q'_2 & \\ & -\frac{e_2 q_3}{q'_2} & q_3 + e_3 - v & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & -q'_{n-1} \\ & & & & -\frac{q_n e_{n-1}}{q'_{n-1}} & q_n - v \end{pmatrix}$$

de façon que  $A' + vI$  est semblable à

$$(5) \quad {}^1A = \begin{pmatrix} q_1 + e_1 & -q_2 & & 0 \\ -e_1 & q_2 + e_2 & -q_3 & \\ & -e_2 & q_3 + e_3 & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & -q_n \\ & & & & -e_{n-1} & q_n \end{pmatrix} = R A R^{-1},$$

si nous posons

$$R = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & 0 \\ & 1 & -1 & \\ & & 1 & -1 \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & -1 \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}$$



Ainsi le procédé de calcul (3), que nous écrivons formellement

$$(6) \quad Z \xrightarrow{v} Z',$$

correspond essentiellement à une transformation de similitude de la matrice  $A$ , suivie d'une soustraction de  $vI$ . C'est pourquoi

$$(7) \quad \lambda'_k = \lambda_k - v, \quad (k = 1, 2, \dots, n),$$

si  $\lambda, \lambda'$  désignent les valeurs propres de  $A$  respectivement  $A'$ .

Une autre règle découlant de l'analogie avec les matrices concerne l'annulation du dernier élément  $q_n$  :

$$(8) \quad q_n = 0 \implies \lambda_n = 0,$$

en d'autres termes 0 est une valeur propre de la ligne  $q_d$   
 $\{ q_1, e_1, \dots, q_{n-1}, e_{n-1}, 0 \}$ . En effet, il vient d'une façon générale

$$A(1, 1, \dots, 1)^T = (0, 0, \dots, 0, q_n)^T.$$

Par conséquent, s'il nous est possible d'effectuer une suite de pas  $q_d$

$$(9) \quad Z_0 \xrightarrow{v_0} Z_1 \xrightarrow{v_1} Z_2 \xrightarrow{v_2} \dots Z_j$$

avec un choix approprié des translations  $v_0, v_1, \dots$ , tel que, pour tout  $j$ ,  $q_n^{(j)}$  (c'est-à-dire le dernier élément de la ligne  $q_d$  de  $Z_j$ ) devient très faible, dans ce cas 0 est approximativement une valeur propre de  $Z_j$ . Il en résulte, eu égard à (7)

$$(10) \quad \sum_{i=0}^{j-1} v_i \text{ est une valeur propre approchée de } Z_0.$$

Exemple numérique : Valeurs propres de la ligne qd  $Z_0 = \left\{ 4, 3, 3, 2, 2, 1, 1 \right\}$ , correspondant au polynôme de LAGUERRE  $L_4(x)$ . (Les lignes qd obtenues sont disposées comme obliques dans un schéma qd.)

[illegible]

Ainsi, nous avons pratiquement trouvé la valeur propre  $\lambda = 0,32$  (la valeur exacte étant 0,322548) ; les autres valeurs propres peuvent être déduites de la ligne qd tronquée suivante

$$\bar{z}_2 = \left\{ 8.023284, 0.561992, 3.966365, 0.453166, 1.698165 \right\}.$$

## 2. Lignes qd positives

Le procédé de calcul (3) et spécialement sa continuation itérative (9) sont compromis, étant donné qu'un dénominateur peut tendre vers 0 dans l'opération ( $e_{k-1}/q'_{k-1}$ ). Il existe cependant un cas spécial, pour lequel on peut éviter aisément qu'aucun des dénominateurs critiques  $q'_1, \dots, q'_n$  ne s'annule jamais ;  $q'_n$  peut devenir égal à zéro, mais n'apparaît point comme dénominateur.

Ce cas est défini comme suit :

Si tous les éléments d'une ligne qd  $Z = \{q_1, e_1, \dots, q_n\}$  sont positifs, alors  $Z$  est appelée une ligne qd positive, ce qui s'écrit  $Z > 0$ .

Théorème 1 :

Les valeurs propres d'une ligne qd positive sont réelles, simples et positives.

En vue de la démonstration remarquons que la matrice  $A$  est semblable à

$$(12) \quad H = \begin{pmatrix} q_1 & \sqrt{q_1 e_1} & & 0 \\ \sqrt{q_1 e_1} & q_2 + e_1 & \sqrt{q_2 e_2} & \\ & \sqrt{q_2 e_2} & \ddots & \sqrt{q_{n-1} e_{n-1}} \\ 0 & & \sqrt{q_{n-1} e_{n-1}} & q_n + e_{n-1} \end{pmatrix}$$

La matrice  $H$  est réelle, symétrique et irréductible et possède une décomposition du type de CHOLESKI  $R^T R$ , où

$$R = \begin{pmatrix} \sqrt{q_1} & \sqrt{e_1} & & 0 \\ & \sqrt{q_2} & \sqrt{e_2} & \\ & & \ddots & \sqrt{e_{n-1}} \\ 0 & & & \sqrt{q_n} \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de  $H$  constituent également celles de la matrice  $H_1 = R R^T$  déduite de la décomposition précédente

$$(13) \quad H_1 = \begin{pmatrix} q_1 + e_1 & \sqrt{q_2 e_1} & & & \\ \sqrt{q_2 e_1} & q_2 + e_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \sqrt{q_n e_{n-1}} & \\ & & & \sqrt{q_n e_{n-1}} & q_n \end{pmatrix}$$

Remarquons, en outre que les valeurs propres de la ligne  $q_d$

$$'Z = \{ q_n, e_{n-1}, q_{n-1}, \dots, e_1, q_1 \}$$

sont celles de la matrice

$$(14) \quad 'H = \begin{pmatrix} q_n & \sqrt{q_n e_{n-1}} & & & \\ \sqrt{q_n e_{n-1}} & q_{n-1} + e_{n-1} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \sqrt{q_2 e_1} & \\ & & & \sqrt{q_2 e_1} & q_1 + e_1 \end{pmatrix}$$

que l'on obtient en appliquant à  $H_1$  une rotation de  $180^\circ$ , il s'en suit que les valeurs propres de  $'Z$  et  $Z$  coïncident.

D'autre part, puisqu'une matrice symétrique est susceptible d'être rendue positive par addition d'un multiple approprié de la matrice unité et qu'une matrice tridiagonale définie positive peut être mise sous forme (12), nous pouvons toujours trouver les valeurs propres de telles matrices moyennant des lignes  $q_d$

positives. Pour celles-ci il vient

Théorème 2 :

Si la ligne qd  $Z_0$  est positive, les lignes qd engendrées par

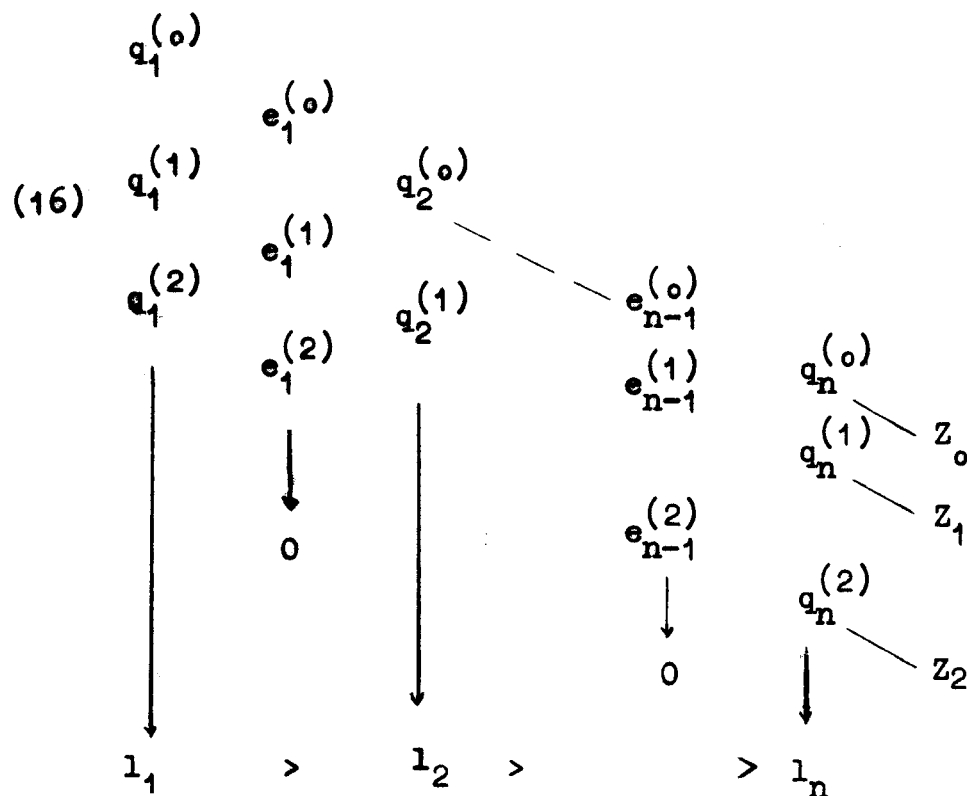
$$Z_0 \xrightarrow{e} Z_1 \xrightarrow{o} Z_2 \xrightarrow{o} \dots$$

c'est-à-dire moyennant l'algorithme qd sans translations sont positives et nous obtenons

$$(15) \quad \lim_{j \rightarrow \infty} Z_j = \left\{ \lambda_1, 0, \lambda_2, \dots, 0, \lambda_n \right\},$$

où  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  désignent les valeurs propres par ordre décroissant.

Il découle de ce théorème que, si nous disposons les éléments de toutes les lignes qd  $Z_j = \left\{ q_1^{(j)}, e_1^{(j)}, q_2^{(j)}, \dots, q_n^{(j)} \right\}$  en une table qd



- a) toutes les grandeurs de cette table sont positives,  
 b) les colonnes  $q$  convergent vers les valeurs propres de  $Z_0$ .

Démonstration :

- a) Remarquons que, si  $v = 0$  et  $q_k > 0$ ,  $e_k > 0$ , quel que soit  $k$ ,  
 il vient eu égard à (3)

$$q'_1 = q_1 + e_1 > e_1$$

$$e'_1 = q_2 * (e_1/q'_1) < q_2$$

$$q'_2 = (q_2 - e'_1) + e_2 > e_2$$

.

.

.

$$q'_n = q_n - e'_{n-1} > 0, \text{ puisque } e_n = 0.$$

Il vient donc

$$\left. \begin{array}{l} q'_k > 0 \\ e'_k > 0 \end{array} \right\} k = 1, \dots, n-1,$$

$$q'_n > 0.$$

Remarque : si nous remplaçons les inégalités strictes par des inégalités au sens large, les éléments  $q_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, n-1$  restent positifs ; aucun dénominateur ne s'annule.

- b) Définissons

$$s_k^{(j)} = \sum_{i=1}^k q_i^{(j)} + \sum_{i=1}^{k-1} e_i^{(j)},$$

il vient, eu égard à (3),

$$s_k^{(j+1)} = s_k^{(j)} + e_k^{(j)}.$$

Il en résulte que  $s_k^{(j)}$  croît de façon monotone pour  $k < n$ ,  
 et est constant pour  $k = n$ . C'est pourquoi, puisque

$$s_k^{(j+1)} \leq s_n^{(j+1)},$$

$$\begin{aligned} & \lim_{j \rightarrow \infty} s_k^{(j)} \\ \text{et} & \lim_{j \rightarrow \infty} e_k^{(j)} \end{aligned}$$

existent nécessairement ; ces limites ont pour valeurs  $s_k$  respectivement 0. En outre, puisque

$$q_k^{(j)} = s_k^{(j)} - e_{k-1}^{(j)} - s_{k-1}^{(j)},$$

il faut que  $\lim_{j \rightarrow \infty} q_k^{(j)}$  existe également.

D'autre part, puisque  $e_k^{(j)} \rightarrow 0$ ,

$$e_k^{(j+1)} = \frac{q_{k+1}^{(j)}}{q_k^{(j+1)}} e_k^{(j)}$$

on ne peut avoir  $\lim_{j \rightarrow \infty} q_k^{(j+1)} < \lim_{j \rightarrow \infty} q_{k+1}^{(j)}$ .

Finalement, si  $j$  est assez grand, la différence

$$\begin{pmatrix} q_1 & \sqrt{q_1 e_1} \\ \sqrt{q_1 e_1} & q_2 + e_1 \end{pmatrix}^{(j)} - \begin{pmatrix} 1_1 & 0 \\ 0 & 1_n \end{pmatrix}$$

où  $1 = \lim_{j \rightarrow \infty} q^{(j)}$ ,

devient arbitrairement petite ; il en est de même de la suivante

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} l_1 & & \\ & l_2 & \\ & & \ddots \\ & & & l_n \end{pmatrix},$$

donc aussi de la différence des valeurs propres ; mais, ces valeurs propres étant fixes, leur différence est nécessairement nulle.

D'après le théorème 2 le procédé de calcul ne peut faire défaut, si la ligne  $q_d$  est positive et toutes les translations sont nulles ; ce procédé peut être utilisé pour calculer les valeurs propres en vertu de la propriété des limites (15). Comme exemple considérons les zéros de  $L_4$ , (voir tableau (11)).

Les  $q_k$  convergent respectivement vers

$$9.395069 \quad 4.536624 \quad 1.745758 \quad 0.322549 \quad .$$

Ces valeurs propres sont obtenues sans difficulté.

Or, pour la pratique générale du calcul, ce procédé n'est pas assez puissant, puisqu'en vertu de (3) et eu égard à la relation

$$(17) \quad e_k^{(j+1)} \sim e_k^{(j)} \frac{\lambda_{k+1}}{\lambda_k}$$

il vient asymptotiquement pour  $j \rightarrow \infty$

$$(18) \quad e_k^{(j)} = O \left[ \left( \lambda_{k+1} / \lambda_k \right)^j \right], \quad (k = 1, \dots, n-1).$$



## II

Ainsi, si  $\lambda_{k+1}$  est voisin de  $\lambda_k$ , la convergence de  $e_k^{(j)}$  vers 0, et par conséquent la convergence de  $q_k^{(j)}$  et  $q_{k+1}^{(j)}$  est défectueuse.

Example :

	$q_1$				
		$e_1$			
	9		$q_2$		
		1		$e_2$	
	10		100		$q_3$
		10		1	
	20		91		9
	.	45,5		0,098901	
(19)	,	.	45,598901		8,901099
	.	.	.	0,019306	
		.	.		8,881793
			.	0,012298	.
					.
				0,011591	
				0,011406	
			8,975668		
				0,011242	
					8,835256

Nous obtenons après un grand nombre d'itérations :

$$z_{19} = \{ 102.181, 0., 9.098473, 0.007285, 8.712540 \}.$$

Initialement la convergence de  $e_2^{(j)}$  semble rapide, mais devient lente ensuite ; cependant asymptotiquement elle tend de nouveau vers  $0(0.93^j)$ .

### 3. Choix des translations

Il s'en suit que pour la pratique générale du calcul l'algorithme qd sans translations, c'est-à-dire avec le choix  $v = 0$  dans la formule (3), n'est pas satisfaisant. Cet algorithme a une importance pratique, uniquement si l'on utilise des translations appropriées ; mais même dans ce cas c'est du choix de la translation  $v$  que dépend la réussite de la méthode. Nous devons considérer les translations

$$Z_0 \xrightarrow{v_0} Z_1 \xrightarrow{v_1} Z_2 \xrightarrow{v_2} \dots$$

où il nous faut choisir les  $v_j$ . En premier lieu nous devons choisir les translations de sorte que les lignes qd  $Z_1, Z_2, \dots$ , sont également positives, pour ne pas perdre les propriétés avantageuses des lignes qd positives. Il vient

#### Théorème 3 :

Si la ligne qd  $Z$  est positive, la ligne  $Z'$  engendrée au moyen de  $Z \xrightarrow{v} Z'$  est positive si et seulement si  $v < \lambda_n$  ( $\lambda_n$  : plus petite valeur propre de  $Z$ ).

#### Démonstration :

- a) si  $v > \lambda_n$ , on trouve, eu égard à (7), que la plus petite valeur propre de  $Z'$  est  $\lambda'_n = \lambda_n - v < 0$  ; il s'en suit que  $Z'$  ne peut être positif. Ainsi la condition  $v < \lambda_n$  est nécessaire.
- b) Supposons que  $v$  est une variable continue croissant à partir de 0, (ce qui s'écrit  $v = 0 \uparrow$ ) ; alors les éléments  $q'$  et  $e'$  définies au moyen de (3) sont également des fonctions continues de  $v$ , c'est-à-dire

$$q'_1 = q_1 + e_1 - v, \quad q'_1 \downarrow \quad (\text{décroît de façon monotone}),$$

$$e'_1 = e_1 * q_2 / q'_1 \uparrow \quad \text{si } q'_1 > 0 \quad (\text{croît de façon monotone}),$$

$$q'_2 = q_2 + e_2 - e'_1 - v \downarrow \quad \text{si } q'_1 > 0 \quad (\text{décroît de façon monotone}),$$

$\vdots$

En résumé, tous les  $e'$  augmentent et tous les  $q'$  diminuent de façon monotone. Puisque pour  $v = \lambda_n$  au moins un  $q'$  ou un  $e'$  doit être négatif ou nul, nous cherchons la plus petite valeur de  $v$  pour laquelle une de ces quantités peut devenir négative ou nulle. Or le produit  $q'_k e'_k = q'_{k+1} e'_k$  est constant et positif, c'est pourquoi uniquement un  $q'$  peut s'annuler le premier. Supposons que ce soit  $q'_k$ ,  $k < n$ , dans ce cas, puisque  $q'_k \rightarrow 0$ , il vient  $e'_k \rightarrow \infty$ ,  $q'_{k+1} \rightarrow -\infty$ , ce qui constitue une contradiction. C'est pourquoi  $q'_n$  devient zéro le premier pour  $v = v_0$ , tandis que tous les autres éléments  $q'_k$  et  $e'_k$  sont encore positifs. Par conséquent  $v_0$  est une valeur propre de  $Z$ , et c'est la plus petite, puisque pour  $v < v_0$ ,  $Z'$  est positif, d'où  $\lambda'_k = \lambda_k - v > 0$  pour tout  $k$ .

De ce raisonnement découle en outre le

Théorème 4 :

Si et seulement si  $v = \lambda_n$ , la nouvelle ligne  $q_d Z'$  obtenue moyennant  $Z \xrightarrow{v} Z'$  a les propriétés

$$(20) \quad q'_k, e'_k > 0, \quad k = 1, \dots, n-1,$$

$$q'_n = 0.$$

Lorsque dans une ligne  $q_d$   $q_n = 0$ , dans la ligne suivante il y a déflation, c'est-à-dire  $n$  est diminué d'une unité.

Exemple :  $n = 3$

3					
5	2				
		1			
	0.4		1		
		1.6		0	
			0		0
				0	

} déflation

$n = 2$

Il s'en suit une autre propriété importante :

Théorème 5 :

Si la ligne  $Z$  est positive et  $v < \lambda_n$   
 respectivement  $v = \lambda_n$ ,  
 les éléments de  $Z'$  possèdent les propriétés

$$(21) \quad \left. \begin{array}{l} q'_k > e_k \\ e'_k < q_{k+1} \end{array} \right\} k = 1, \dots, n-1,$$

respectivement

$$\left. \begin{array}{l} q'_n > 0, \\ q'_n = 0. \end{array} \right\}$$

Il vient finalement :

Théorème 6 :

Chaque élément  $q$  d'une ligne  $q$ d positive  $Z$  constitue une borne supérieure de la plus petite valeur propre, c'est-à-dire

$$(22) \quad \lambda_n < q_k, \quad (k = 1, \dots, n).$$

Démonstration :

Eu égard à la relation (3) nous obtenons pour  $v = q_k$

$$(23) \quad q'_k = ((q_k - e'_{k-1}) - q_k) + e_k = e_k - e'_{k-1}$$

Supposons que  $v \leq \lambda_n$ , nous devrions obtenir, d'après le théorème 5

$$\left. \begin{array}{l} q'_k > e_k, \quad k = 1, \dots, n-1, \\ q'_n > 0, \end{array} \right\}$$

mais pour  $n > 1$ , ces inégalités contredisent (23).

Ainsi la question du choix des translations  $v_j$  pour le procédé de calcul

$$z_0 (> 0) \xrightarrow{v_0} z_1 \xrightarrow{v_1} z_2 \xrightarrow{v_2} \dots$$

est au moins résolue théoriquement.

- a) D'après le théorème 3,  $v_j$  ne doit pas dépasser la plus petite valeur propre  $\lambda_n^{(j)}$  de  $Z_j$ .
- b) D'après le théorème 4,  $v_j$  doit être choisi légèrement inférieur à  $\lambda_n^{(j)}$ , parce que dans ce cas seulement  $q_n^{(j)}$  devient très faible.
- c) Si  $q_n^{(j)}$  est faible, il existe d'après le théorème 6 des bornes rapprochées pour  $\lambda_n$ ; d'après (22) il vient

$$q_n^{(j)} > \lambda_n^{(j)} ;$$

il résulte de cette inégalité ainsi que de (7)

$$(24) \quad \sum_0^{j-1} v_i \leq \lambda_n \leq \sum_0^{j-1} v_i + q_n^{(j)}.$$

Or, dans la pratique du calcul on ne peut évidemment pas déterminer les translations suivant les règles a et b. Il faut plutôt s'approcher par tâtonnement de la plus petite valeur propre  $\lambda_n$  moyennant une sorte de procédé de bisection : On essaie d'effectuer une première itération avec une certaine valeur  $v_0$  (par exemple  $q_n/2$ ). Si le pas réussit (c'est-à-dire la nouvelle ligne

$Z_1$  est positive) on essaie un autre pas  $Z_1 \xrightarrow{v_1} Z_2$  avec  $v_1 = v_0/2$ .

Si cependant le pas  $Z_0 \xrightarrow{v_1} Z_1$  échoue, (la ligne  $Z_1$  n'est pas positive), on pose  $v_0 := v_0/2$  et l'on répète l'essai

$Z_0 \xrightarrow{v_0} Z_1$ . De cette façon on obtient finalement une ligne qd

$$Z_j = \left\{ q_1^{(j)}, e_1^{(j)}, \dots, q_{n-1}^{(j)}, e_{n-1}^{(j)}, q_n^{(j)} \right\},$$

dans laquelle  $e_{n-1}^{(j)}, q_n^{(j)}$  sont tellement petits ( $< \epsilon$ ), que les valeurs propres de  $Z_j$  sont modifiées très peu ( $< 2\epsilon$ ), si l'on pose  $q_n^{(j)} := e_{n-1}^{(j)} := 0$ . Dans ce cas 0 est une valeur propre de  $Z_j$ ; les autres valeurs propres résultent de la ligne qd défléchie

$$(25) \quad 'Z_j = \left\{ q_1^{(j)}, e_1^{(j)}, q_2^{(j)}, e_2^{(j)}, \dots, q_{n-1}^{(j)} \right\}.$$

Même si nous connaissons la plus petite valeur propre de façon précise, ce serait uniquement d'une utilité théorique.

Il est vrai que pour  $v_0 = \lambda_n$ , nous obtenons théoriquement  $q_n^{(1)} = 0$ , ce qui peut se présenter aussi en pratique pour des cas anodins, par exemple

$$Z = \left\{ 4, 3, 3, 2, 2, 1, 1 \right\} \text{ avec } v = 0.322548;$$

4																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																												
---	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

Cependant pour la ligne qd où  $n = 5$ ,  $q_k = k$ ,  $e_k = 0.01$ , c'est-à-dire  $Z_0 = \{1, 0.01, 2, 0.01, 3, 0.01, 4, 0.01, 5\}$ , des difficultés se présentent. Dans ce cas il vient  $\lambda_s = 0.9900985285 \dots$ . Si l'on calcule avec cinq décimales, on peut approximer  $\lambda_s$  au mieux

par 0.99009 ou 0.99010. Pour  $v = 0.99010$  l'itération fait défaut, puisqu'il vient  $q_4^{(1)} = -12.57\dots$ , mais pour  $v = 0.99009$ ,  $q_5^{(1)}$  ne devient pas encore petit. Nous avons besoin de quelques pas supplémentaires où  $v = 0$  pour rendre  $q_n$  faible.

Le schéma qd s'écrit :

1

0.01

0.01991                      2

1.00452                      0.01

1.02443	0.01539	3
---------	---------	---

0.01509      1.94932      0.01

1.94962      0.07059      4

0.07058      0.56665      0.01

0.5666<sup>5</sup>      2.45326      5

$$2.45322^6 \quad 0.02038$$

0.02042<sup>38</sup>      3.98953

$$3.98172^{9.53}$$

3.98544      0.00781<sup>0</sup>

0.00780

0.00001

$\Sigma v$	$v$
0	
	0.99009
0.99009	
	0
0.99009	
	0
0.99009	
	0.00001

Remarquons que la valeur soulignée est imprécise, la valeur exacte étant 0.00914.

- a) L'arithmétique d'intervalles entraîne des prévisions beaucoup trop pessimistes en ce qui concerne la précision.
- b) Les résultats seraient meilleurs, si l'on posait  $v = 0.990095$  dans une arithmétique à 6 décimales.
- c) Si l'on trouve, dans la ligne  $Z_2, q_3 = 0.56665$  (calcul en virgule flottante), il s'en suit dans la ligne  $Z_3 : q_5 = 0$ .

#### 4. Influence de l'arithmétique

Nous désignons par arithmétique une représentation, qui fait correspondre, à chaque nombre réel  $x$  d'un domaine  $|x| \leq M$ , de

façon univoque un nombre réel  $\check{x}$  d'un ensemble  $Z$ , ainsi que quatre opérations  $\check{+}$ ,  $\check{-}$ ,  $\check{*}$ ,  $\check{/}$ , en tant qu'approximations des opérations exactes  $+$ ,  $-$ ,  $*$ ,  $/$ . L'on écrit

$$x \rightarrow \check{x} \in Z \quad \text{pour} \quad |x| \leq M.$$

La borne  $M$  définit le domaine d'"overflow" de l'arithmétique, c'est-à-dire l'ensemble  $\{x, |x| \leq M\}$  de tous les nombres  $x$  auxquels on ne peut attribuer aucun  $\check{x}$ . Il existe cependant un ordinateur, où l'on fait correspondre également à ces nombres un  $\check{x}$ , appelé  $\infty$ . En outre il existe un domaine d'"underflow"  $|x| \leq \mu$ , c'est-à-dire l'ensemble de tous les  $x$  avec  $\check{x} = 0$ . On peut admettre sans plus  $\mu \ll 1 \ll M$ .

Une telle arithmétique doit satisfaire à certaines conditions, notamment

$$(26) \quad \left. \begin{array}{ll} x < y & \check{x} \leq \check{y} \\ x = y & \check{x} = \check{y} \\ x > y & \check{x} \geq \check{y} \end{array} \right\} \text{ (Monotonie de la correspondance)}$$

$$\begin{array}{ll} x = -y & \check{x} = -\check{y} \text{ (Symétrie par rapport à l'origine)} \\ (\check{\check{x}}) = \check{x} \end{array}$$

$$\left. \begin{array}{l} \check{0} = 0 \\ \check{1} = 1 \end{array} \right\} \text{ Existence d'un élément neutre et d'un élément unité}$$

En outre il faut qu'il existe une relation entre chaque opération  $\check{X} = \check{+}, \check{-}, \check{*}, \check{/}$  et l'opération exacte  $X$  :

$$(27) \quad \check{a} \check{X} \check{b} = (\check{a} X \check{b})^{\check{}} \quad (\text{pour } X = +, -, *, /).$$

Il peut arriver pourtant que l'on ait  $|\check{a} X \check{b}| > M$  ; alors l'opération n'est pas exécutable, ce que l'on désigne par "overflow" en virgule flottante.



La condition (27) requiert que le résultat d'une opération soit correctement arrondi, ce qui n'est pas toujours réalisé de façon rigoureuse. Nous donnons un exemple utilisant une arithmétique en virgule flottante à trois décimales :

$$\begin{array}{r} 10.4 \\ -0.527 \\ \hline 9.873 \end{array} \rightarrow 9.87$$

Il existe pourtant des ordinateurs qui traitent cet exemple comme suit :

$$\begin{array}{r} 10.4 \rightarrow 10.4 \\ -0.527 \rightarrow -0.5 \\ \hline 9.90 \end{array}$$

Une autre caractéristique de l'arithmétique employée est la précision : on requiert l'existence de deux nombres  $\delta$  et  $\Theta$  ( $0 < \delta < \Theta$ ), tels que

$$(28) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \check{a} + \check{b} = \check{a} & \text{pourvu que } |\check{b}| \leq \delta * |\check{a}|, \\ \check{a} + \check{b} \neq \check{a} & \text{pourvu que } |\check{b}| > \Theta * |\check{a}|. \end{array} \right.$$

Il vient nécessairement  $\Theta \geq \delta$ , mais dans le cas où le rapport  $\Theta/\delta$  est excessif (p. ex.  $\Theta/\delta = 10^7$ ), il faut considérer l'arithmétique en question comme non équilibrée. La limite inférieure qu'on peut atteindre pratiquement pour  $\Theta/\delta$  vaut 2 (Système dual).

Le nombre  $\Theta$  permet d'évaluer l'erreur maximale d'arrondissement de l'arithmétique, car de

$$a = \check{a} + \check{\epsilon},$$

il découle d'après (27) :

$$\check{a} = (\check{a} + \check{\epsilon})^\vee = \check{a} \dot{+} \check{\epsilon};$$

d'après (28) ceci n'est possible que si

$$|\check{\epsilon}| \leq \Theta |\check{a}|.$$

Il en résulte :

L'erreur relative maximale de l'arithmétique vaut  $\Theta$ .

Finalement on exige que  $\theta \uparrow 4 = (\theta^4)^{\vee} \neq 0$ . On exprime ainsi la propriété significative du point de vue pratique, qui consiste à dire que le domaine de l'exposant de la représentation en virgule flottante doit comporter au moins le quadruple du nombre de décimales (Règle de MAEHLY).

Des règles (26) découlent d'autres propriétés de l'arithmétique :

Théorème 7 :

Si  $\check{a} > 0$  et  $\check{b} > 0$  constituent des nombres du domaine  $Z$ , il découle de (26) :

$$(29) \quad \begin{aligned} \check{a} + \check{b} &> \check{a} && \text{pourvu que } \check{b} > 0, \\ \check{a} - \check{b} &> 0 && \text{pourvu que } \check{a} > \check{b}, \\ \check{a} * \check{b} &< \check{a} && \text{pourvu que } 0 < \check{b} < 1, \\ \check{b}/\check{a} &< 1 && \text{pourvu que } \check{a} > \check{b} > 0. \end{aligned}$$

N.B. Au cas où une arithmétique ne satisfait pas aux conditions (26), mais où (29) est valable, les conclusions du § 5 restent cependant partiellement justes.

Démonstration du théorème 7 : Il vient d'après (27)  $\check{a} + \check{b} = (\check{a} + \check{b})^{\vee} > \check{a}$ , puisque d'après (26)  $\check{a} + \check{b} > \check{a}$ . En outre  $\check{a} - \check{b} = (\check{a} - \check{b})^{\vee} > 0$ , puisque  $\check{a} - \check{b} > 0 = 0$ . De la même façon il vient  $\check{a} * \check{b} = (\check{a} * \check{b})^{\vee} < \check{a}$ , comme  $\check{b} < 1$  entraîne  $\check{a} * \check{b} < \check{a}$ ; et finalement  $(\check{b}/\check{a}) = (\check{b}/\check{a})^{\vee} < 1 = 1$ , c.q.f.d.

Remarque sur l'utilité des différents algorithmes :

algorithme QR pour bandes symétriques	→ toutes les valeurs propres,
bisection	→ 15 valeurs propres,
algorithme qd	→ les 15 valeurs propres les plus basses.

Pour ce dernier algorithme, il y a convergence moyennant certaines translations.

### 5. Propriétés persistantes de l'algorithme qd

En général les propriétés des méthodes numériques sont modifiées considérablement par suite des erreurs d'arrondissement. A titre d'exemple, dans une arithmétique satisfaisant aux conditions du § 2 la série infinie  $\sum_{k=1}^{\infty} a_k$  est déjà convergente, si l'on a quel que soit  $k$ ,

$$(30) \quad 0 < a_k < \frac{M}{2}.$$

Par ailleurs nous entendons par propriétés persistantes d'un procédé de calcul des propriétés qui sont conservées dans le calcul numérique, c'est-à-dire moyennant une arithmétique définie au § 4. La divergence d'une série infinie ne constitue donc pas une propriété persistante ; par contre, étant donné la condition (30), la convergence en tant que telle est persistante, même si la somme de la série ne l'est pas.

Au contraire toute une série de propriétés de l'algorithme qd (ainsi que de l'algorithme QR et du procédé de bisection) sont persistantes.

#### Théorème 8 :

Si la ligne qd  $Z = \{q_1, e_1, \dots, q_n\}$  est positive, il vient pour la ligne  $Z'$  calculée numériquement (c'est-à-dire moyennant une arithmétique non exacte dans le sens du § 4) selon  $Z \xrightarrow{o} Z'$

$$(31) \quad \begin{aligned} q'_k &> 0, & e'_k &> 0, \quad (k = 1, 2, \dots, n-1), \\ q'_n &> 0. \end{aligned}$$

(C'est une condition contre le dépassement de capacité de l'ordinateur).

En d'autres termes pour des lignes qd positives l'algorithme qd sans translation réussit nécessairement toujours dans le calcul numérique. Des non-fonctionnements de la méthode dus à des divisions

par zéro sont exclus, pourvu qu'on décompose immédiatement une ligne qd contenant des éléments  $e$  qui s'annulent.

Effectivement il peut arriver dans le calcul numérique que la ligne  $Z_0$  étant positive, quelques éléments  $e_k$  de la ligne  $Z_1$  se déduisant de  $Z_0$  par la translation 0 s'annulent. Ceci peut avoir pour conséquence que dans la ligne  $Z_2$  même des éléments  $q_k$ ,  $k < n$ , s'annulent, ce qui entraîne des divisions par zéro de la forme

$$e_k'' = q_{k+1}' * (e_k' / q_k'') \text{ où } e_k' = q_k'' = 0.$$

Exemple :  $n = 5$ ,  $Z_0 = \{ 10^{-200}, 10^{-200}, 2, 1, 1, 10^{-200}, 10^{-200}, 1, 1 \}$

On utilise une arithmétique en virgule flottante avec  $\Theta = 2^{-36}$ ,  $\theta = 2^{-37}$ ,  $\mu = 2^{-2^{10}}$ ,  $M = 2^{2^{10}}$ . Il vient d'après (3) pour  $v = 0$

$q_1$									
	$e_1$								
	$10^{-200}$		$q_2$						
		$10^{-200}$		$e_2$					
	$2 \cdot 10^{-200}$		2						
(32)		1		1	$q_3$				
	1		2		1	$e_3$			
		1		0.5	1	$10^{-200}$	$q_4$		
			0.5		0.5		$10^{-200}$	$e_4$	
				0.5	0.5	0			
					0.5		1	1	$q_5$
								1	1
									0

Si, afin d'éviter le risque d'une division par zéro dans le calcul de  $e_k''$ , on sépare la ligne qd  $Z'$  en deux lignes

$$\{q_1', e_1', q_2', e_2', q_3'\} \text{ et } \{q_4', e_4', q_5'\}$$

et on continue le calcul séparément avec celles-ci, on obtient, à de petites erreurs près, les valeurs propres exactes, (dans ce cas

$$\left\{ 2 + \sqrt{2}, 2 - \sqrt{2}, 0 \right\} \text{ et } \left\{ 2, 0 \right\} ).$$

Autrement, pour éviter la séparation, il convient de remplacer 0 par  $10^{-200}$ .

La possibilité de séparation mentionnée découle de la proposition :

L'ensemble des  $n$  valeurs propres de la ligne  $q_d$

$$Z = \left\{ q_1, e_1, q_2, \dots, q_k, 0, q_{k+1}, e_{k+1}, \dots, q_n \right\}$$

constitue la réunion des ensembles des valeurs propres

des deux lignes  $q_d \left\{ q_1, e_1, \dots, q_k \right\}$  et  $\left\{ q_{k+1}, e_{k+1}, \dots, q_n \right\}$ .

Le fait qu'un élément  $q$  quelconque constitue une limite supérieure pour la plus petite valeur propre ne doit pas faire défaut pour l'arithmétique considérée. Il vient en effet

#### Théorème 9 :

Si  $\check{Z}$  représente une ligne positive  $q_d$ , et  $q_j$  désigne un élément  $q$  de cette ligne, un pas  $q_d$  où  $v = q_j$  échoue nécessairement dans le calcul numérique ou aboutit à  $q'_n = 0$ .

#### Exemple :

$q_1$		
	$e_1$	
1		$q_2$
	$10^{-10}$	
0.5		0.5
	$10^{-10}$	
		0

Dans ce cas l'on a  
 $v = 0.5$  ;  $\Theta = 10^{-8}$  ;  
 et il vient  
 $\lambda_{\min} = 0.5 - \Theta (10^{-10})$ .

Démonstration :

Moyennant l'hypothèse  $\check{e}'_{j-1} > 0$ , il vient, eu égard à (3) et à (26) :

$$\check{q}'_j = (\check{q}_j - \check{e}'_{j-1}) - \check{q}'_j + \check{e}_j < \check{e}_j$$

$$\check{e}'_j = \check{q}_{j+1} * (\check{e}_j / \check{q}'_j) > \check{q}_{j+1}$$

$$\check{q}'_{j+1} = ((\check{q}_{j+1} - \check{e}'_j) - \check{q}_j) + \check{e}_{j+1} < \check{e}_{j+1},$$

et ainsi de suite, jusqu'à ce que l'on ait  $\check{q}'_k < 0$ . Au plus tard, il vient  $\check{q}'_n < \check{e}_n = 0$ , c.q.f.d.

Dans la suite nous utiliserons une proposition concernant la plus petite valeur propre :

Si dans une ligne qd positive Z au moins un  $q_k$  ( $k=1, \dots, n$ ) augmente, ou au moins un  $e_k$  ( $k=1, \dots, n-1$ ) diminue, la plus petite valeur propre  $\lambda_n$  de la ligne qd Z augmente également.

On peut écrire cette proposition sous forme condensée :

$$H) \quad Z > 0, \quad \text{un } q \uparrow \quad \text{ou un } e \downarrow \quad ;$$

$$C) \quad \lambda_n \downarrow .$$

La démonstration repose sur le fait que  $\lambda_n$  est la plus grande translation, qui ne rend aucun  $q$  négatif, si le pas qd est effectué de façon exacte.

Enfin nous trouvons que la propriété de monotonie des éléments  $q_k$ ,  $e_k$  en rapport avec des variations de  $v$  est persistante.

Théorème 10 :

Soit Z une ligne positive qd, à partir de laquelle on calcule une autre ligne positive  $Z^*$  suivant la loi  $Z \xrightarrow{v^*} Z^*$ . Si l'on déduit en outre de Z une

ligne  $Z^{**}$  selon  $Z \xrightarrow{v^{**}} Z^{**}$ , où  $v^{**} < v^*$ , cette ligne vérifie les relations

$$(33) \quad \begin{aligned} q_k^{**} &\geq q_k^*, & k = 1, 2, \dots, n, \\ 0 &\leq e_k^{**} \leq e_k^*, & k = 1, 2, \dots, n-1, \end{aligned}$$

ce qui vaut également pour le calcul numérique.

Démonstration :

Il vient, d'après l'hypothèse  $Z^* > 0$ ,

$$\begin{aligned} q_k^* &= (q_k \simeq e_{k-1}^*) \simeq v^* \dot{+} e_k, \\ q_k^{**} &= (q_k \simeq e_{k-1}^{**}) \simeq v^{**} \dot{+} e_k \end{aligned}$$

Moyennant l'hypothèse d'induction  $0 \leq e_{k-1}^{**} \leq e_{k-1}^*$ , il vient d'après (29)

$$(q_k \simeq e_{k-1}^*) \leq (q_k \simeq e_{k-1}^{**}), \text{ et ensuite}$$

$$(q_k \simeq e_{k-1}^*) \simeq v^* \leq (q_k \simeq e_{k-1}^{**}) \simeq v^{**}, \text{ et de même}$$

$$q_k^* \leq q_k^{**}, \text{ dont il résulte d'après (3)}$$

$$e_k^{**} = q_{k+1} \dot{*} (e_k \dot{/} q_k^{**}) \leq e_k^* ;$$

cependant il vient dans chaque cas  $e_k^{**} \geq 0$ .

Pour  $k = 1$  on peut poser  $e_{k-1}^* = e_{k-1}^{**} = 0$ , ce qui établit l'induction complète, c.q.f.d.

Remarque :

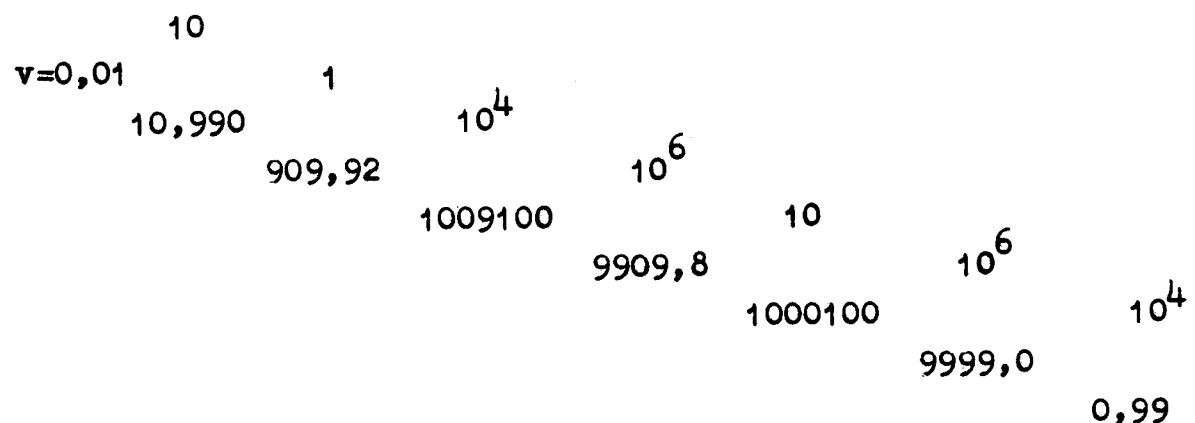
De petites variations de  $v$  peuvent n'avoir aucune influence sur la ligne  $q_d$  entière. Les valeurs propres ne sont pas persistantes. En effet l'action de converger persiste, mais non pas les valeurs

obtenues. Exemple :  $(1, 10^{-50}, 1, 10^{-50}, 1)$ .

Il existe donc une propriété de l'algorithme qd, qui est influencée de façon inopportune par les erreurs d'arrondissement ; il s'agit de la propriété (7).

En effet, si une itération qd  $Z \xrightarrow{v} Z'$  doit diminuer en principe toutes les valeurs propres de  $v$ , nous ne pouvons guère es-compter que ce soit le cas dans le calcul numérique. Il peut même arriver que pour  $Z \xrightarrow{v} Z'$ , où  $v > 0$ , la plus petite valeur propre  $\lambda_n$  soit augmentée, lorsqu'on effectue les opérations numériques.

Exemple :  $n = 4$



Pour passer de la ligne  $Z$  à la ligne  $Z'$ , on effectue un pas qd avec la translation  $v = 0,01$  au moyen de l'emploi d'une arithmétique en virgule flottante à cinq décimales.

La plus petite valeur propre de  $Z$  vaut  $\lambda_4 \approx 0,884$ , tandis que pour la plus petite valeur propre de  $Z'$  il vient  $\lambda'_4 = 0,971$ . La plus petite valeur propre a donc été augmentée de neuf fois  $v$ .

Cette propriété est très ennuyeuse pour la pratique du calcul ; elle peut avoir pour conséquence que la plus petite valeur propre s'écarte toujours de l'origine, et ceci malgré des translations positives, ayant toutes pour but de produire une ligne qd semi-positive. Cette remarque nous amène à introduire une variante stationnaire de l'algorithme qd, à propos de laquelle la plus petite valeur propre ne peut augmenter, tant que l'on a  $v > 0$ .



## 6. Influence des erreurs d'arrondissement

Nous avons déjà exposé que l'algorithme qd était un procédé de bonne qualité ; l'influence des erreurs d'arrondissement sur les valeurs propres calculées se maintient dans des limites convenables. Remarquons cependant que ce raisonnement est valable, bien que les valeurs des éléments  $q$  et  $e$  sont fortement altérées le cas échéant.

Exemple :

$$Z = \left\{ 14159, 26535, \dots, 78027 \right\} n = 200$$

(nombres entiers de cinq chiffres tirés des 995 premières décimales de  $\Pi$ ).

Nous obtenons pour  $v = 0$  exactement

$$Z_1 = \left\{ 40694, 58550.57863, \dots, 78023.38287, 3.61713 \right\},$$

tandis que le calcul numérique avec  $\Theta = 2^{-36} = 1,5 \cdot 10^{-11}$  et  $\Phi = 2^{-37}$  nous donne :

$$Z_1 = \left\{ 40694, \dots, 78021.11277, 5.88723 \right\}.$$

Quoique la première ligne qd soit tellement incorrecte, nous obtenons en poursuivant le calcul :

$$\lambda_{200} = 5,34207 \cdot 10^{-7} \text{ au lieu de la valeur exacte } 1,91199 \cdot 10^{-7},$$

$$\lambda_{199} = 0,29402528 \text{ au lieu de la valeur exacte } 0,29402496.$$

Les deux valeurs propres comportent une erreur de  $3 \cdot 10^{-7}$ , ce qui est moindre que la moitié de la valeur qu'on pouvait escompter dans le cas le plus favorable, c'est-à-dire

$$\Theta \cdot q_{200} = 1,5 \cdot 10^{-11} \cdot 78027 < 1,5 \cdot 10^{-6}.$$

Remarquons en outre que, si ce problème était traité moyennant une arithmétique d'intervalles, il faudrait représenter la

quantité  $q_{200}^{(1)}$  par un intervalle comprenant les deux valeurs mentionnées ci-dessus. Comme les autres pas  $q_d$  calculent  $q_{200}^{(j)}$  uniquement par soustraction à partir de  $q_{200}^{(1)}$ , l'intervalle ne peut plus être réduit, et la valeur limite  $\lambda_{200}$  serait remplacée par un intervalle de longueur  $> 2$ . L'arithmétique d'intervalles n'est donc pas applicable dans ce cas.

Les exemples précédents ont été calculés avec une arithmétique en virgule fixe. Cette arithmétique n'est pas adéquate en général, sauf dans des cas simples. Nous allons le montrer en prenant comme exemple la ligne  $q_d$

$$Z = \{ 1, 0.0002, 1 \} \quad (n = 2).$$

Moyennant une arithmétique en virgule fixe à quatre décimales nous obtenons, pour  $v = 0$ ,

1		
	0.0002	
1.0002		1
	0.0002	
.		0.9998
.		
.		
1.1428		
	0.0002	
1.1430		0.8572
.	0.0001	
.		0.8571
.		
1.3334		
	0.0001	
1.3335		0.6667
	0.0000	
↓		↓
$z_1$		$z_2$

Les vraies valeurs sont dans ce cas :

$$1.014$$

et

$$0.986.$$

L'arithmétique en virgule flottante donne des résultats beaucoup plus précis ; mais également dans ce cas les nombreuses itérations ont une influence défavorable sur les résultats. C'est pourquoi il faut éviter d'effectuer de nombreuses itérations pour la détermination d'une valeur propre.

Voici deux remarques à propos des valeurs propres de deux lignes qd consécutives :

Première remarque : Si l'on a

$$(34) \quad \begin{aligned} q'_k &= q_k - e'_{k-1} - v_k + e_k, \\ e'_k &= q_{k+1} * (e_k / q'_k), \end{aligned}$$

les valeurs propres de la ligne qd Z' sont celles de la matrice

$$H' = \begin{pmatrix} q'_1 & \sqrt{q'_1 e'_1} & & & \\ \sqrt{q'_1 e'_1} & q'_2 + e'_1 & \sqrt{q'_2 e'_2} & & \\ & \sqrt{q'_2 e'_2} & q'_3 + e'_2 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & q'_n - v_n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} q_1 + e_1 - v_1 & \sqrt{q_2 e_1} & & & 0 \\ \sqrt{q_2 e_1} & q_2 + e_2 - v_2 & \sqrt{q_3 e_2} & & \\ & \sqrt{q_3 e_2} & & \ddots & \\ & & & & q_n - v_n \end{pmatrix}$$

$$= H_1 - \begin{pmatrix} v_1 & & 0 \\ & v_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & v_n \end{pmatrix}$$

et il vient  $\left| \lambda'_k - \lambda_k \right| < \max_k \left| v_k \right|$

Ainsi s'explique ou se justifie le procédé de "tricherie" suivant : soit  $Z \xrightarrow{0} Z'$ , nous posons uniquement pour une valeur de  $k$

$$q'_k := q_k - e'_{k-1} - \varepsilon + e_k$$

de façon à rendre cette quantité égale à  $e_k$ . Dans ce cas nous trouvons  $v_k = \varepsilon$ , tous les autres  $v$  étant nuls ; il s'en suit qu'aucune valeur propre n'est changée de plus de  $\varepsilon$ .

Deuxième remarque : Erreurs d'arrondissement.

Dans le calcul numérique nous trouvons

$$1) \quad e'_k * q'_k = q_{k+1} \checkmark (e_k / q'_k) * q'_k$$

$$e'_k * q'_k / (q_{k+1} * e_k) = \frac{q_{k+1} \checkmark (e_k / q'_k) / q_{k+1}}{e_k} (1 \pm 2\theta)$$

$$\sqrt{e'_k * q'_k} / \sqrt{q_{k+1} * e_k} = (1 \pm \theta)$$

$$2) \quad q'_k = ((q_k \checkmark e'_{k-1}) \checkmark v) \checkmark e_k$$

$$q'_k + e'_{k-1} - q_k + v - e_k = q_k \checkmark e'_{k-1} \checkmark v \checkmark e_k - e_k + e'_{k-1} - q_k$$

$$\text{erreur} \leq \theta q'_k + \theta (q_k - e'_{k-1}) + \theta q_k ,$$

d'où

$$\left| (q'_k + e'_{k-1}) - (q_k + e_k - v) \right| < \Theta \left| q'_k + 2 q_k \right|.$$

Comme conséquence nous obtenons, si

$$\text{Max } (q, e, q', e',) = m ,$$

$$\left| H' - (H_1 - vI) \right| =$$

$$(35) \quad \begin{pmatrix} q'_1 & \sqrt{q'_1 e'_1} & & \\ \sqrt{q'_1 e'_1} & q'_2 + e'_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} q_1 + e_1 - v & \sqrt{q_2 e_1} & & \\ \sqrt{q_2 e_1} & q_2 + e_2 - v & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

$$< \Theta \begin{pmatrix} 3m & m & & \\ m & 3m & m & \\ & m & 3m & m \\ & & m & \ddots \end{pmatrix}$$

Or, les valeurs propres de cette dernière matrice sont comprises entre  $m$  et  $5m$ . Il s'en suit

$$\left| \lambda'_k - (\lambda_k - v) \right| < 5m\Theta.$$

Donc aucune valeur propre n'est changée de plus de  $5m\Theta$ , et ceci, quels que soient les écarts entre les valeurs calculées des  $q'$  et  $e'$  et les valeurs exactes de ces éléments.

#### 7. Forme stationnaire de l'algorithme qd

Soit une ligne qd positive  $\left\{ \hat{Z} = \hat{q}_1, \hat{e}_1, \dots, \hat{q}_n \right\}$  et calculons à partir de  $\hat{Z}$  deux nouvelles lignes  $Z$  et  $Z^*$ , telles que

$$(36) \quad \hat{Z} \xrightarrow{0} Z, \quad \hat{Z} \xrightarrow{v} Z^*,$$

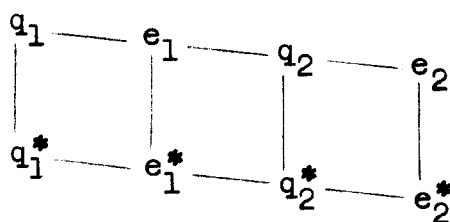
dans ce cas il existe un rapport direct entre  $Z$  et  $Z^*$  :

$$\begin{aligned} q_k &= \hat{q}_k + \hat{e}_k - e_{k-1} & q_k^* &= \hat{q}_k + \hat{e}_k - e_{k-1}^* - v \\ e_k &= \hat{q}_{k+1} * \hat{e}_k / q_k, & e_k^* &= \hat{q}_{k+1} * \hat{e}_k / q_k^* . \end{aligned}$$

Par élimination de  $\hat{q}_k, \hat{e}_k$ , il vient :

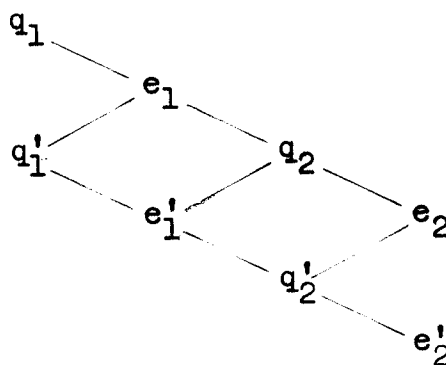
$$\begin{aligned} (37) \quad q_k^* &= q_k - (e_{k-1}^* - e_{k-1}) - v & (\text{où } e_0 = e_0^* = 0) . \\ e_k^* &= e_k * (q_k / q_k^*) , \end{aligned}$$

Nous écrivons le schéma qd comme suit :



forme stationnaire,

au lieu de



forme progressive.

Ce problème intervient à propos des fractions continues. Soit la fonction génératrice d'une ligne qd

$$f(z) = \frac{1}{z} - \frac{q_1}{1} - \frac{e_1}{z} - \frac{q_2}{1} - \dots$$

La fraction continue

$$zf(z) - 1 = \frac{1}{z-v} - \frac{q_1'}{1} - \frac{e_1'}{z-v} - \dots$$



décrit par (37) est exactement le même que la construction de la suite de STURM dans la méthode de bisection, avec la différence qu'au lieu de calculer les déterminants

$$\begin{vmatrix} q_1 - v \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} q_1 - v & \sqrt{q_1 e_1} \\ \sqrt{q_1 e_1} & q_2 - v \end{vmatrix}, \quad \text{etc....},$$

nous calculons les quotients de déterminants consécutifs et ceux-ci constituent les  $q_k^*$ .

Après ces remarques sur la méthode de bisection, nous revenons à la variante stationnaire de l'algorithme qd, que nous écrivons symboliquement  $Z \xrightarrow{v} Z^*$ . Quelques propriétés de cette variante sont les mêmes que pour la forme normale de l'algorithme qd. Ainsi, par exemple,

- a) pour  $Z \xrightarrow{v} Z^*$ , il vient  $\lambda_k^* = \lambda_k - v$ ,  
 b)  $Z^* > 0$ , si et seulement si  $v < \lambda_n$ .

Par contre d'autres propriétés sont différentes, par exemple

- c)  $Z \xrightarrow{0} Z^*$  n'a aucun effet,  $Z^* = Z$ ,  
 d)  $Z \xrightarrow{v} Z^* \quad Z^* \xrightarrow{v^*} Z^{**} \implies Z \xrightarrow{v+v^*} Z^{**}$ ,

e) du point de vue théorique :

$$Z \xrightarrow{v>0} Z^* \implies \text{si } Z^* > 0,$$

$$q_k^* < q_k$$

pour tout  $k$  ;

$$e_k^* > e_k$$



du point de vue numérique :

$$Z \underline{v} > Z^* \implies \text{tant que } Z^* \geq 0,$$

$$(38) \quad \begin{aligned} q_k^* &\leq q_k \\ e_k^* &\geq e_k \end{aligned} \quad \text{pour tout } k,$$

et, en vertu d'un théorème antérieur,

$$(39) \quad \lambda_n^* \leq \lambda_n,$$

où  $\lambda_n^* < \lambda_n$ , si  $Z^* \neq Z$ .

Nous pouvons employer le procédé de bisection, si nous n'obtenons pas de valeur propre moyennant la forme progressive de l'algorithme qd dans un temps convenable ; nous arrivons finalement à une ligne qd, pour laquelle le pas  $Z \underline{v} Z^*$  échoue.

I) Effectuons sur une ligne  $Z$  un pas normal qd  $Z \xrightarrow{0} Z'$ .

Si nous trouvons  $|q_k' - e_k| < \varepsilon$ , nous pouvons utiliser le procédé de tricherie. Or, il vient

$$q_k' - e_k = \frac{q_k}{\left(1 + \frac{e_{k-1}}{q_{k-1}} \left(1 + \frac{e_{k-2}}{q_{k-2}} \left(1 + \dots \left(1 + \frac{e_1}{q_1}\right)\right)\right)\right)}$$

En effet, il découle de (3) pour  $v = 0$

$$q_k' - e_k = q_k - e_{k-1}' = q_k \left(1 - \frac{e_{k-1}}{q_{k-1}'}\right)$$

$$= \frac{q_k}{q_{k-1}'} (q_{k-1}' - e_{k-1}),$$

ou bien

$$\begin{aligned} \frac{1}{q_k' - e_k} &= \frac{1}{q_k} \left(1 + \frac{e_{k-1}}{q_{k-1}' - e_{k-1}}\right) \\ &= \frac{1}{q_k} \left(1 + \frac{e_{k-1}}{q_{k-1}} \left(1 + \frac{e_{k-2}}{q_{k-2}' - e_{k-2}}\right)\right). \end{aligned}$$

II) Supposons maintenant que  $Z$  est la ligne  $qd$ , pour laquelle le pas (stationnaire)  $Z \xrightarrow{v} Z^*$  échoue. Dans ce cas il existe un  $k$ , pour lequel  $q_k^* \leq 0$ ; il en résulte, eu égard aux relations

$$\begin{aligned}
 e_{k-1}^* &:= e_{k-1} * (q_{k-1} / q_{k-1}^*) ; \\
 (40) \quad q_k^* &:= q_k + (e_{k-1} - e_{k-1}^*) - v ; \\
 q_k < q_k - q_k^* &= v \left( 1 + \frac{e_{k-1}}{q_{k-1}^*} \left( 1 + \frac{e_{k-2}}{q_{k-2}^*} \left( 1 + \dots \left( 1 + \frac{e_1}{q_1^*} \right) \dots \right) \right) \right) .
 \end{aligned}$$

C'est pourquoi il vient en fin de compte

$$q_k' - e_k < v \frac{1 + \frac{e_{k-1}}{q_{k-1}^*} \left( 1 + \frac{e_{k-2}}{q_{k-2}^*} \left( \dots \right) \right)}{1 + \frac{e_{k-1}}{q_{k-1}} \left( 1 + \frac{e_{k-2}}{q_{k-2}} \left( \dots \right) \right)} .$$

Il existe également des formules analogues donnant pour la plus petite valeur propre des bornes plus rapprochées que les éléments  $q_k$ .

$\Sigma v$ (stat.)	1	0.01	2	0.01	3	0.01	4	0.01	5	$v$ (progr.)
										0
$3 \cdot 10^{-6}$	0.01991	1.00452	0.01539	1.94932	0.07059	0.56665	2.45326	0.02038	3.98953	0.99009
$7.5 \cdot 10^{-6}$	0.01991	1.00490	0.01500	1.99932	0.02059	1.94281	1.07709	0.04641	3.96350	
$8.75 \cdot 10^{-6}$	0.01991	1.00496	0.01494	2.00785	0.01206	3.31715	< 0			

Or, nous obtenons

$$q'_4 - e_4 < 1,25 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{1 + \frac{1.94281}{0.01206} (1 + \dots)}{1 + \frac{1.94281}{0.02059} (1 + \dots)} < 2,5 \cdot 10^{-6}$$

d'où  $\varepsilon = 2,5 \cdot 10^{-6}$ .

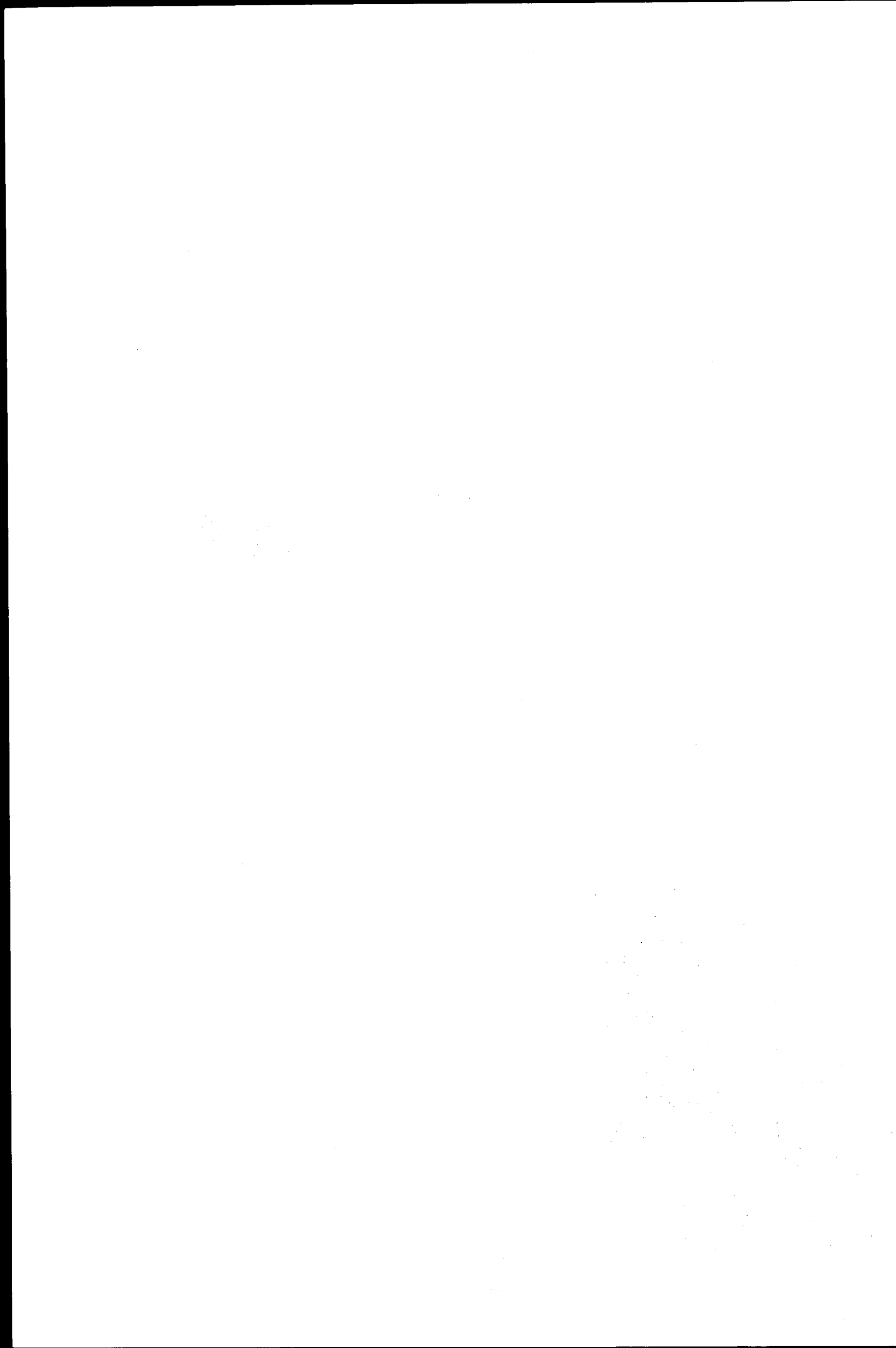
Effectivement il vient après un pas qd progressif

0.01991									
	1.00490								
1.02481		0.01500							
	0.01470		1.99932						
		1.99962		0.02059					
			0.02059		1.94281				
				1.94281		1.07709			
					1.07709		1.07709		
						<u>0.04641</u>	<u>0.04641</u>		
							3.96350	3.96350	
									0

### B I B L I O G R A P H I E

1. H. RUTISHAUSER Der Quotienten-Differenzen-Algorithmus, Mitt. Nr 7, Inst. für Angew. Math. ETH 1957
2. H. RUTISHAUSER Stabile Sonderfälle des Quotienten-Differenzen-Algorithmus, Numerische Mathematik 5 (1963) 95-112.

v  
rogr.)  
0  
99009



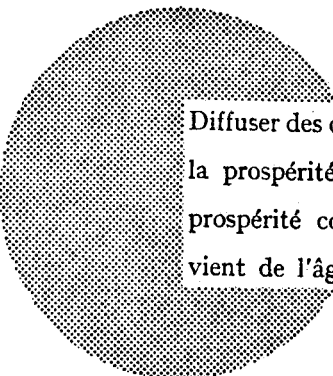
#### AVIS AU LECTEUR

Tous les rapports Euratom sont signalés, au fur et à mesure de leur publication, dans le périodique mensuel **EURATOM INFORMATION**, édité par le Centre d'information et de documentation (CID). Pour souscrire un abonnement (1 an : FF 75, FB 750) ou recevoir un numéro spécimen, prière d'écrire à :

**Handelsblatt GmbH**  
**"Euratom Information"**  
**Postfach 1102**  
**D-4 Düsseldorf (Allemagne)**

ou à

**Office de vente des publications**  
**des Communautés européennes**  
**2, Place de Metz**  
**Luxembourg**



Diffuser des connaissances c'est distribuer de la prospérité — j'entends la prospérité collective et non la richesse individuelle — et cette prospérité contribue largement à la disparition du mal qui nous vient de l'âge des ténèbres.

**Alfred Nobel**

## BUREAUX DE VENTE

Tous les rapports Euratom sont vendus dans les bureaux suivants, aux prix indiqués au verso de la première page de couverture (lors de la commande, bien indiquer le numéro EUR et le titre du rapport, qui figurent sur la première page de couverture).

### OFFICE CENTRAL DE VENTE DES PUBLICATIONS DES COMMUNAUTES EUROPEENNES

2, place de Metz, Luxembourg (Compte chèque postal N° 191-90)

#### BELGIQUE — BELGIË

MONITEUR BELGE  
40-42, rue de Louvain - Bruxelles  
BELGISCH STAATSBAD  
Leuvenseweg 40-42, - Brussel

#### LUXEMBOURG

OFFICE CENTRAL DE VENTE  
DES PUBLICATIONS DES  
COMMUNAUTES EUROPEENNES  
9, rue Goethe - Luxembourg

#### DEUTSCHLAND

BUNDESANZEIGER  
Postfach - Köln 1

#### NEDERLAND

STAATSDRUKKERIJ  
Christoffel Plantijnstraat - Den Haag

#### FRANCE

SERVICE DE VENTE EN FRANCE  
DES PUBLICATIONS DES  
COMMUNAUTES EUROPEENNES  
26, rue Desaix - Paris 15<sup>e</sup>

#### ITALIA

LIBRERIA DELLO STATO  
Piazza G. Verdi, 10 - Roma

#### UNITED KINGDOM

H. M. STATIONERY OFFICE  
P. O. Box 569 - London S.E.1

EURATOM — C.I.D.  
51-53, rue Belliard  
Bruxelles (Belgique)